

СПЕКТРОСКОПИЯ И ФИЗИКА В ИССЛЕДОВАНИИ МИНЕРАЛЬНОГО ВЕЩЕСТВА: НОВЫЕ ТРЕНДЫ РАЗВИТИЯ МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИХ МЕТОДИК

Вотяков С.Л.

Институт геологии и геохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Votyakov@igg.uran.ru

В сообщении рассматриваются следующие вопросы.

- Место спектроскопии (физики) минералов среди наук о Земле. Научные дисциплины на границе наук – минералогии и физического материаловедения.

- Физика и спектроскопия минералов – интеграционное междисциплинарное направление в науках о Земле на границе минералогии и физического материаловедения, включающее комплексное экспериментальное и теоретическое исследование реальной дефектной структуры и свойств минералов, использующее методы спектроскопии твердого тела и решающее как фундаментальные, так и прикладные задачи по реконструкции условий образования и преобразования минералов.

- Предмет исследования: оптические и магнитные свойства минералов, акустические моды, процессы радиационной деструкции минералов, нарушения структуры – собственные и примесные дефекты, наноразмерные кластеры, отклонение от стехиометрии, электронное и структурное состояние примесных (матричных) ионов.

- Цели и задачи: получение фундаментальной информации о реальной микроструктуре минералов как основе для их типизации, реставрации условий их кристаллизации и эволюции в определенной геологической ситуации; использование результатов при петрогенетических, геохронологических построениях.

- Подходы и методы исследования: спектроскопия твердого тела, микроскопия, синтез аналогов и лабораторное моделирование авторадационных и термобарических воздействий, теоретическое моделирование атомной и электронной структуры минералов.

- Этапы развития спектроскопии минералов.

- Первый, начальный этап (с 50-х годов до 70-80 годов XX века): сформировались школы по физике минералов: в СССР – московская, казанская, киевская, новосибирская, свердловская, сыктывкарская; опубликованы обобщающие монографии по спектроскопии различных классов минералов – оксидов, силикатов, фосфатов, карбонатов и др.

- Исследования сотрудников ИГГ [Краснобаев, Вотяков, Крохалев, 1988; Вотяков, Краснобаев, Крохалев, 1993; Чашухин, Вотяков, Щапова, 2007].

Окраска и люминесценция минералов ряда циркон-гафнон-ксенотим связаны с точечными дефектами структуры, обусловленными взаимным растворением этих минералов, с примесными элементами подгруппы железа, палладия, платины и редких земель, с кислородными вакансиями и неустойчивыми валентными состояниями катионов решетки. Тип и концентрация дефектов, их терморadiационные свойства определяются составом и температурой среды кристаллизации и режимом посткристаллизационных отжига и облучений минералов этого ряда. Обоснованы новые кристаллохимические признаки, типоморфные для минералов определенного генезиса (генетические индикаторы, в частности, для цирконов кимберлитов Якутии, Архангельской области и Тимана доказано уникальное сочетание минералого-геохимических и спектроскопических параметров); выполнена интерпретация результатов на основе сопоставления с синтетическими аналогами и результатами модельных лабораторных воздействий на минералы.

- Второй этап развития спектроскопии минералов (90 гг XX века – начало XXI века): качественный скачок в аналитическом оборудовании и технологии обработки цифровых данных, повышение чувствительности и локальности анализа; «микроспектроскопия»; развитие расчетных методов и компьютерного моделирования атомного и электронного строения в физике твердого тела. Публикации «второго поколения» по спектроскопии различных классов минералов (оксидов, силикатов, фосфатов, карбонатов, биоминеральных образований и др.) преимущественно зарубежных авторов в журнале «Physics and Chemistry of Minerals», обобщающие монографии, обзоры [Gaft, Reisfeld, Panczer, 2005].

- Основные направления работ.

Исследования в «духе» классической физики минералов на основе новых разделов микроспектроскопии (рамановского и электронного микронзонда, люминесценции и др.): основной тренд развития методик исследований в физике минералов – от «imaging» к «mapping»: XX век – «imaging» = изображение микрообъекта – оптическая, электронная и др. виды микроскопии; гетерогенность (гетерохронность) зерен минералов; необходима информация о



Рис. Физика (спектроскопия) минеральных объектов как междисциплинарный раздел минералогии

пространственном распределении микропримесей и свойств в зернах минералов; XXI век – «mapping» = картирование микрообъекта - площадное-плоскостное (объемное) со шкалой значений параметра картирования; рождение нового направления – площадной и объемной микротомографии зерен минералов [Nasdala, Kronz, Wirth, 2009; Nasdala, Hanchar, Rhede, 2010].

- Физика наноминералов: ультрадисперсное состояние минеральных образований, наноразмерного кластера и отдельного иона в макроминерале, их микро- и наноструктура минералов, эффекты кластеризации.

- Спектроскопия био- и техногенных минералов как основа для биоэкологических (техногенных)

построений, картирования и мониторинга. Палеонтологическая, археологическая и медицинская физика биоминеральных образований как новые междисциплинарные направления исследований в науках о Земле, в медицине, археологии [Смирнов, Вотяков и др., 2009].

- Спектроскопия радиационных дефектов в минералах (стеклах) в связи с проблемами абсолютной геохронологии (петрохронологии), ретроспективной дозиметрии и захоронения отходов [Вотяков и др., 2011].

- Комплексное микронзондовые и спектроскопические исследования минералов (с высоким пространственным разрешением) как основа для петро-

ронологических построений [Engi, Lanari, Kohn, 2017; Kylander-clark, 2017]. Концепция петрохронологии как интеграции метаморфической петрологии и геохронологии. Петрохронология – интерпретация особенностей элементного (изотопного) состава минералов-геохронометров в совокупности с их возрастными характеристикам на основе интеграция петрологических, геохимических и геохронологических подходов с целью интерпретации геологических процессов.

- Неизотопное микрозондовое датирование минералов, в том числе с низким содержанием U и Th (циркона, бадделеита, ксенотима и др.), комплексов с локальными спектроскопическими исследованиями минералов. Классический метод неизотопного химического датирования в микрозондовом варианте не утратил перспективности на фоне изотопных подходов как первичный низкзатратный экспресс-метод, основанный на использовании современных микрозондов высокой чувствительности, сопоставительных схем расчета возраста, в том числе изохронного для нескольких минералов с существенно различным содержанием U и Th в сочетании с изучением спектроскопических свойств минералов и их термо-радиационного повреждения. Методика микрозондового неизотопного датирования – единственная для оценки возрастной эволюции минералов с высоким содержанием U (Th) часто значимо гетерохронных. Перспективы: использование методики для анализа различных геологических объектов.

- Теоретическая спектроскопия минералов (теоретическое материаловедение): моделирование атомного, электронного строения и физико-химических свойств минералов, дефектов их структуры, интерпретация спектров, расчеты состояния химической связи. Российско-американская школа по теоретической физике минералов [Oganov, Ono, 2010]: Разработка методов предсказания кристаллических структур веществ при различных давлениях; предсказание структур материалов при высоком давлении, исследование их физико-химических характеристик, в том числе механических свойств материалов; исследование молекулярных кристаллов; разработка новых металлических и ферромагнитных материалов.

- Третий этап развития спектроскопии минералов (задачи на будущее): подготовка молодых кадров по физике минералов; физика минералов и проблемы петрогенеза, анализ взаимосвязи типа дефекта с условиями кристаллизации и эволюции минерала; выявление общих закономерностей, описывающих эволюцию состояния ионов и структурных дефектов в минералах в процессе развития Земли, в геобио-

логических и техногенных процессах (в настоящее время в подавляющем большинстве публикаций результаты исследований по генетической физике минералов носят поисковый, часто спорный и даже ограниченный характер; единых законов не установлено, выявленные закономерности носят достаточно частный характер); спектроскопия в решении проблем геохронологии (петрохронологии).

ЛИТЕРАТУРА

1. Вотяков С.Л., Краснобаев А.А., Крохалев В.Я. Проблемы прикладной спектроскопии минералов. Екатеринбург: Наука, 1993.
2. Вотяков С.Л., Щапова Ю.В., Хиллер В.В. Кристаллохимия и физика радиационно-термических эффектов в ряде U-Th-содержащих минералов как основа для их химического микрозондового датирования. Екатеринбург, 2011.
3. Краснобаев А.А., Вотяков С.Л., Крохалев В.Я. Спектроскопия цирконов свойства геологические приложения. М.: Наука, 1988.
4. Смирнов Н.Г., Вотяков С.Л. и др. Физико-химические характеристики ископаемых костных остатков млекопитающих и проблема оценки их относительного возраста. Екатеринбург, 2009.
5. Чашухин И.С., Вотяков С.Л., Щапова Ю.В. Кристаллохимия хромшпинели и окситермобарометрия ультрамафитов складчатых областей. Екатеринбург, 2007.
6. Engi M., Lanari P., Kohn M. J. Significant ages - an introduction to petrochronology // *Rev. Mineral Geochemistry*. 2017. 83. 1–12.
7. Gaft M., Reisfeld R., Panczer G. Modern Luminescence Spectroscopy of Minerals and Materials // Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 2005. 356 p.
8. Kylander-clark A.R.C. Petrochronology by Laser-Ablation Inductively Coupled Plasma // *Rev. Mineral Geochemistry*. 2017. V.83. P.183–198.
9. Nasdala L., Kronz A., Wirth R. Alteration of radiation-damaged zircon and the related phenomenon of deficient electron microprobe totals // *Geoch. Cosmoch. Acta*. 2009. V. 73. P.1637-1650.
10. Nasdala L., Hanchar J.M., Rhede D. Retention of uranium in complexly altered zircon: An example from Bancroft, Ontario // *Chem. Geol.* 2010. V.269. P. 299-300.
11. Oganov A., Ono S. Theoretical and experimental evidence for a post-perovskite phase of MgSiO₃ in Earth's D layer // *Nature*. V. 430. P. 445-448.